

КИЇВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
ІМЕНІ ТАРАСА ШЕВЧЕНКА

ФІЗИЧНИЙ ФАКУЛЬТЕТ
КАФЕДРА ЕКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЇ ФІЗИКИ

Холоімов Валерій Вячеславович

ЗВІТ
з лабораторної роботи №4

«СТРУКТУРА МУЛЬТИПЛЕТИВ В АТОМНИХ СПЕКТРАХ. ВИВЧЕННЯ
ЕНЕРГЕТИЧНОЇ БУДОВИ НАЙБЛИЖЧИХ ЗБУДЖЕНИХ СТАНІВ АТОМА РТУТІ

практикум "Атомна фізика" 3 курс

Викладач практикуму
Н.В. Башмакова

Київ 2021

1 Теоретичні відомості

1.1 Водневоподібні системи

Енергія електрона в атомі водню і воднеподібних атомах в наближенні, в якому не враховується вплив співна електрона, залежить тільки від одного, приймаючого цілі значення головного квантового числа n і як за теорією Бора, так і за теорією Шредінгера визначається за формулою:

$$W = W_n = -\frac{Z^2 m_0 e^4}{32\pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^2} \cdot \frac{1}{n^2}$$

Z - число, що характеризує зарядовий стан ядра атома або атомного залишку, в полі якого рухається електрон, e - заряд електрона, m_0 - маса електрона, ϵ_0 - електрична стала і \hbar стала Планка h поділена на 2π .

Врахування спін-орбітальної взаємодії призводить до більш складної залежності енергії електрона в атомі водню та воднеподібних атомах від квантових чисел n та j :

$$W = W_{nj} = -\frac{Z^2 m_0 e^4}{32\pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^2} \left[1 + \frac{Z^2 e^4}{16\pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^2 c^2 n^2} \left(\frac{n}{j+1} - \frac{3}{4} \right) \right]$$

де $j = l \pm s$ - внутрішнє квантове число, яке характеризує певний момент електрона j .

Певний момент атому \bar{J} , який для атомів з одним електроном в зовнішній оболонці практично співпадає з моментом електрона \bar{j} , характеризується внутрішнім квантовим числом J . У випадку зв'язку Рассела-Саудерса, коли визначене значення мають повний орбітальний та повний спіновий моменти атома \bar{L} і \bar{S} , повний момент:

$$\bar{J} = \bar{L} + \bar{S}$$

а квантове число J набуває значень

$$J = L + S, L + S - 1, L + s - 2, |L - S|$$

Повний орбітальний та спіновий моменти

$$\bar{L} = \sum \bar{L}_i$$

$$\bar{S} = \sum \bar{s}_i$$

де \bar{l}_i і \bar{s}_i - орбітальний та спіновий моменти i -го електрона, яким відповідає орбітальне та спінове квантові числа l_i , s_i .

Величина

$$\varkappa = 2S + 1$$

визначає можливе число проекцій вектора \bar{S} на виділений напрямок, Сукупність станів атома з даною електронною конфігурацією при заданих числах L і S називається термом. Величина \varkappa визначає мультиплетність терма. Стани, що відносяться до одного терму відрізняються значеннями повного моменту атому \bar{J} .

При заданих значеннях L і S можна визначити мультиплетне розщеплення, тобто залежність енергії системи від квантового числа J . Це енергія спін-орбітальної взаємодії. вона пропорційна скалярному дометку моментів \bar{L} і \bar{S} .

Енергію рівня можна записати у вигляді

$$W_J = A + B\overline{L}\overline{S}$$

де A і B - сталі для заданого терму, зокрема, стала A враховує всі види взаємодії за винятком спин-орбітальної, а стала B характеризує спин-орбітальну взаємодію. Тоді маємо:

$$\begin{aligned}\overline{J}^2 &= \overline{L}^2 + \overline{S}^2 + 2\overline{L}\overline{S} \\ |\overline{J}| &= \hbar\sqrt{J(J+1)}, |\overline{L}| = \hbar\sqrt{L(L+1)}, |\overline{S}| = \hbar\sqrt{S(S+1)} \\ \overrightarrow{L}\overrightarrow{S} &= \frac{\hbar^2}{2} [J(J+1) - L(L+1) - S(S+1)]\end{aligned}$$

Різниця енергії між сусідніми рівнями терму з квантовими числами J і $J+1$ буде наступною:

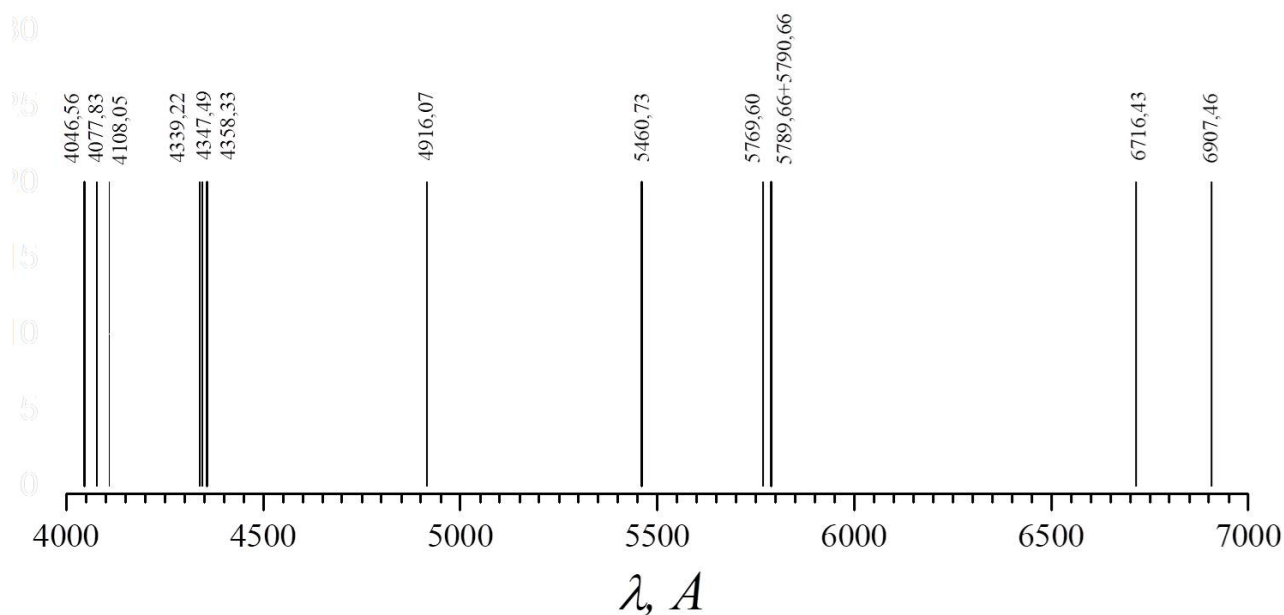
$$\Delta W_{J+1,J} = W_{J+1} - W_J = B\hbar^2(J+1)$$

тобто пропорційно більшому значенню квантового числа.

Для легких елементів мультиплетне розщеплення дуже мале, в той час як для важких атомів воно досягає сотень та тисяч cm^{-1} . Часто лінії, які належать до одного мультиплету лежать на протилежних кінцях видимої області спектра. Саме це спостерігається для атома ртуті, у видимій частині спектра якої найбільш інтенсивні зелена, синя та фіолетова лінії належать до одного мультиплету.

3 Аналіз отриманих результатів

Теоретичні дані



$$\lambda_1 = 4046; \lambda_2 = 4077; \lambda_3 = 4108$$

$$\lambda_4 = 4339; \lambda_5 = 4347; \lambda_6 = 4358$$

$$\lambda_7 = 4916$$

Експериментальні дані:

$$\lambda_1 = 4044; \lambda_2 = 4077; \lambda_3 = 4108$$

$$\lambda_4 = 4339; \lambda_5 = 4349; \lambda_6 = 4355$$

$$\lambda_7 = 4860; \lambda_8 = 4891$$

Відхилення для кожної лінії крім сьомої менше 0.05%

4 Висновок

У ході лабораторної роботи було досліджено спектральні лінії ртуті.

Експериментально отримані дані гарно узгодилися з теоретичними. Отримані лінії:

Перша фіолетова лінія $\lambda = 404.4nm$

Друга фіолетова лінія $\lambda = 407.7nm$

Синя лінія $\lambda = 435.6nm$

Бірюзова лінія $\lambda = 486.0nm$

Можливе відхилення бірюзової лінії від теоретичного значення пов'язане з використанням шкали.

5 Теоретичні питання

5.1 Спін-орбітальна взаємодія. Енергія атома з урахуванням спін-орбітальної взаємодії.

Спін-орбітальна взаємодія - внесок спіна на рух частинки (електрона). Під впливом магнітного поля електрон зазнає впливу сили Лоренца. Енергія спін-орбітальної

взаємодії:

$$\Delta E = -\frac{e\hbar}{m^2c^2} \frac{\delta\phi}{r\delta r} (\vec{L} \cdot \vec{S})$$

Енергія електрона внаслідок існування спін-орбітальної взаємодії:

$$E = -\frac{Rhc}{n^2} Z^2 \left[1 + \frac{\alpha^2 Z^2}{n} \left(\frac{1}{j + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4n} \right) \right]$$

5.2 Векторна модель атома. Правила визначення орбітального, спінового та повного механічних моментів багатоелектронного атома.

Векторна модель атома використовується для зв'язку Рассела-Саудерса. Кожному моменту кількості руху відповідає вектор. Сума окремих векторів визначається з урахуванням просторового квантування.

Повний орбітальний \vec{L} і повний спіновий \vec{S} моменти атомів визначають з виразів:

$$\begin{aligned}\vec{L} &= \sum \vec{l}_i \\ \vec{S} &= \sum \vec{s}_i\end{aligned}$$

Повному орбітальному моменту \vec{L} атома відповідає квантове число L , яке може набувати тільки цілочисельних значень. Якщо атом має два електрони з квантовими числами l_1, l_2 , то значення L визначаються з виразу:

$$L = l_1 + l_2; l_1 + l_2 - 1; \dots; |l_1 - l_2|$$

Число S , що відповідає спіновому моменту атома може набувати напівцілих значень для непарного і цілих для парного числа електронів в атомі.

Стани, що належать до одного терму відрізняються значенням \vec{J} , яке можна знайти з співвідношення

$$J = L + S; L + S - 1; \dots; |L - S|$$

Парність атома визначається за формулою $(-1)^{\sum l_i}$

5.3 Принцип тотожності частинок. Принцип Паулі. Орбітальний, спіновий і повний механічні моменти повністю заповнених електронних підоболонки (s, p, d і т. д.).

Загальне формулювання принципу Паулі: В атома не може бути двох електронів, стани яких характеризувались би однаковими наборами чотирьох квантових чисел n, l, m_l, m_s . Моменти повністю заповнених оболонок $= 0$, тому їх можна не брати до уваги при розрахунку термів атомів.

5.4 Правило Маделунга для послідовності заповнення електронних підоболонки атомів.

Правило Маделунга:

- 1) Заповнення відбувається в порядку зростання суми $n + l$
- 2) При рівності суми, заповнення відбувається в порядку зростання n

5.5 Правила Хунда для визначення терма з найменшою енергією.

Правило Хунда:

1) Найменшу енергію має електрон з найбільшим спіновим числом S_{max} 2) При рівності спінового числа, меншу енергію має електрон з більшим орбітальним числом L_{max} 3) При рівності орбітального числа: якщо оболонка заповнена менше ніж на половину, **зростання** енергії відбувається в порядку $J_{min} \rightarrow J_{max}$. Якщо оболонка заповнена більше ніж на половину, порядок змінюється на протилежний.

5.6 Правило інтервалів Ланде для визначення відстані між компонентами мультиплету.

Згідно з правилом Ланде, відстань між сусідніми рівнями одного мультиплету пропорційна більшому з чисел J . Різницю енергій між рівнями $W_{J+1}W_J$ можна знайти з виразу

$$\Delta W_{J+1,J} = B(J+1)\hbar$$

B - константа, що пов'язана з спіноорбітальною взаємодією, визначається квантовими числами LiS .

5.7 Зв'язок Рассела-Саундерса, j-j зв'язок. Правила відбору для дипольних переходів у випадку зв'язку Рассела-Саундерса. Класифікація термів в багатоелектронних системах

jj зв'язок відрізняється від зв'язку Рассела-Саундерса тим, що насамперед враховує взаємодію між орбітальним моментом і спіном одного й того самого електрона. Визначають повний момент одного електрона і після векторно рахують повний момент атома:

$$\begin{aligned}\vec{j}_i &= \vec{l}_i + \vec{s}_i \\ \vec{J} &= \sum \vec{j}_i\end{aligned}$$

Правила відбору:

- 1) Правило Лапорта: парність змінюється
- 2) $\Delta l = \pm 1$
- 3) $\Delta m_l = 0, \pm 1$
- 4) $\Delta S = 0$
- 5) $\Delta m_s = 0$
- 6) $\Delta J = 0, \pm 1$
- 7) Неможливий перехід $J_1 = 0 \rightarrow J_2 = 0$
- 8) $\Delta m_j = 0, \pm 1$
- 9) $\Delta L = 0, \pm 1$
- 10) $\Delta m_L = 0, \pm 1$

5.8 Про що свідчить порушення інтеркомбінаційної заборони (правила відбору $\Delta S = 0$) для переходу $6s7s\ ^1S_0\ 6s6p\ ^3P_1$ в атомі ртуті?